

Internet Electronic Journal Nanociencia et Moletrónica

Mayo 2005, Vol. 3; No. 1, págs. 538- 548 (2005)

Una Nano-Hélice en Base a la Biopartícula TMV impulsada por el Efecto de Electrorrotación

R. Durán, A. Ramírez, A. Zehe
Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
Facultad de Ciencias de la Electrónica. Depto. de Posgrado
Apartado Postal #1505, 72000 Puebla, Pue., México
e-mail: rduran@ece.buap.mx

recibido: febrero 2005

revisado: febrero 2005

publicado: mayo 2005

Citation of the article:

R. Durán, A. Ramírez, A. Zehe Una Nano-Hélice en Base a la Biopartícula TMV impulsada por el Efecto de Electrorrotación. Internet Electrón. J. Nanocs. Moletrón. 2005, 3(1), 538- 548
<http://www.revista-nanociencia.ece.buap.mx>

Copyright © 2005 BUAP

Una Nano-Hélice en Base a la Biopartícula TMV impulsada por el Efecto de electrorotación

R. Durán, A. Ramírez, A. Zehe
Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
Facultad de Ciencias de la Electrónica. Depto. de Posgrado
Apartado Postal #1505, 72000 Puebla, Pue., México
e-mail: rduran@ece.buap.mx

recibido: febrero 2005

revisado: febrero 2005

publicado: mayo 2005

Internet Electron. J. Nanocs. Moletrón. 2005, 3(1), pags. 538- 548

Resumen

El presente trabajo es una contribución a la rama novedosa de las nanociencias y la nanoelectrónica a escala molecular (Moletrónica) [1,2].

Las Nanomáquinas y los Nanorobots realizan movimientos mecánicos semejantes a sus contrapartes macroscópicas, estos son los movimientos de traslación y de rotación. Sin embargo las fuerzas móviles que controlan estos movimientos a escala micro y nanométrica son diferentes. Mientras la gravitación y así, por ejemplo, la fuerza de Coriolis, son típicos en movimientos robóticos industriales, no ocurren a escala nanométrica, la fuerza flotante y el movimiento Browniano pueden llegar a ser importantes. La imposición de fuerzas ocurre principalmente por campos eléctricos externos, corrientes eléctricas y otros campos que interactúan con los átomos, moléculas y partículas.

En el presente trabajo se estudia la generación de un movimiento rotativo controlado, en partículas microscópicas a través de un campo eléctrico alterno, y su dependencia de la geometría de los nano y micro-objetos, sus propiedades dieléctricas y las del medio de suspensión donde se encuentren.

I Introducción

La Nanotecnología tiene como objetivo la manipulación en tres dimensiones (3D) de moiedades químicas para la conformación de moléculas y conglomerados (*'clusters'*), y finalmente ensamblarlos en dispositivos de mayor tamaño o materiales particulares. Permitirá la explotación de las últimas capacidades tecnológicas de sistemas electrónicos, biológicos, magnéticos, y mecánicos a través de nanodispositivos y técnicas [2].

En estos términos, la nanotecnología comprende la manipulación controlada de átomos y moléculas individualmente. Las investigaciones actuales en nanotecnología se centran en objetivos mucho mas básicos, como la construcción y caracterización de microestructuras artificiales, sus propiedades mecánicas, eléctricas, su estabilidad química y su respuesta frente a diversos estímulos. El universo de la nanotecnología es la escala mesoscópica, donde la física clásica pierde su primacía, y ahora se hacen patentes los efectos cuánticos.

A esta escala de distancias, los objetos nanométricos parecen compartir características propias de los objetos “grandes” (o sea clásicos) y de los objetos “moleculares” (cuánticos), además de nuevas características muy únicas. Es en este mundo híbrido, donde se trata de desarrollar una nueva intuición, al lidiar con un conjunto de fenómenos de importancia comparable: desorden, ruido térmico, efectos de superficie, fluctuaciones cuánticas, no linealidad. A escala “normal” muchos de estos efectos son “pequeños” y pueden ser tratados formalmente como perturbaciones. A escala mesoscópica, las perturbaciones pueden ser tan importantes como el fenómeno principal. Sin embargo se trabaja en el desarrollo de más y mejores herramientas para explorar este submundo.

II Fuerza de electrorrotación

Los efectos electrocinéticos ocurren debido a la interacción de dipolos inducidos con campos eléctricos. Han sido usados por muchos años para la manipulación y análisis de células biológicas y partículas en la escala micrométrica. Una variedad de movimientos pueden ser realizados cambiando la naturaleza del campo eléctrico dinámico, incluyendo atracción, repulsión y rotación [3-5].

La polarización, establecida dentro de una partícula dieléctrica es debida al desplazamiento de cargas eléctricas forzadas por el campo eléctrico externo $\vec{E}_0(\hat{r})$:

$$\vec{P}(\hat{r}) = \varepsilon_0(\varepsilon - 1)\vec{E}_i(\hat{r}) = \varepsilon_0(\varepsilon - 1)\alpha(\hat{r})\vec{E}_0(\hat{r}), \quad (1)$$

donde $\alpha(\hat{r})$ es un tensor, o también llamado factor de depolarización, ε_0 es la permitividad del espacio libre, ε es la constante dieléctrica de la partícula, \vec{E}_i es el campo eléctrico en el interior del dieléctrico y \hat{r} es la dirección del campo eléctrico. El factor de polarización $\alpha(\hat{r})$ nos indica que tanto es reducido el campo eléctrico al interior del dieléctrico

$$\vec{E}_i(\hat{r}) = \alpha(\hat{r}) \cdot \vec{E}_0(\hat{r}). \quad (2)$$

Para partículas con geometrías esféricas o elipsoidales, este factor se obtiene de manera casi directa, por ejemplo para la esfera está dado por:

$$\alpha = \frac{3}{\varepsilon + 2}. \quad (3)$$

Para una elipsoide rotativa oblato de radio R y longitud L ($R > L$), α está dado por:

$$\alpha = \{1 - (\varepsilon - 1) \cdot f(q)\}^{-1}, \quad (4)$$

con

$$f(q) = \left[\begin{array}{c} (q^2 + 1)(q \cdot \arctan \frac{1}{q} - 1) \\ q \end{array} \right]. \quad (5)$$

Y para una elipsoide rotativa prolato de longitud L finita, y radio R ($L > R$), $f(q)$ está dado por la ecuación:

$$f(q) = q^2 \left[1 + \frac{\sqrt{q^2 + 1}}{2} \ln \frac{\sqrt{q^2 + 1} - 1}{\sqrt{q^2 + 1} + 1} \right], \quad (6)$$

donde, para ambos casos:

$$q^2 = \frac{R^2}{|L^2 - R^2|}. \quad (7)$$

III La polarización de un cilindro corto

La polarización de una esferoide prolato, una elipsoide y una esfera se obtienen de una manera relativamente sencilla. No es así de directa, sin embargo, la situación en el caso de un cilindro en un campo eléctrico homogéneo $\vec{E}_0(\hat{r})$, (ver figura 1). Obtenemos el vector de polarización a través de [6]:

$$\begin{aligned} \iint \frac{\vec{E}_0(\hat{r}_2) \cdot d\vec{F}_2}{\hat{r}_{12}^3} \frac{\vec{E}_0(\hat{r}_1) \cdot \hat{r}_{12}}{\vec{E}_0^2(\hat{r}_1)} &= \\ 2 \int_0^R \frac{2\pi a da \cdot L}{(a^2 + L^2)^{3/2}} &= \int_L^{(R^2 + L^2)^{1/2}} \frac{r dr}{r^3} \cdot 4\pi L = \\ 4\pi \left[1 - (1 + R^2 / L^2)^{-1/2} \right] &; \\ \vec{P}_1 &= \frac{\epsilon_0 (\epsilon - 1) \vec{E}_0}{1 + (\epsilon - 1) \left(1 - (1 + R^2 / L^2)^{-1/2} \right)}. \end{aligned} \quad (8)$$

Como una polarización homogénea es solo la primera aproximación. Debido a la elección del origen a $z=0$, el campo generado por \vec{P} será demasiado débil en el plano transversal a $z=0$, pero a lo largo del eje z a las caras limitantes del cilindro es demasiado fuerte.

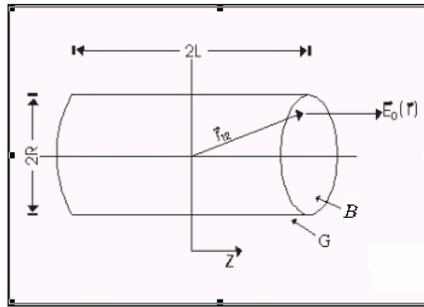


Figura 1: Cilindro dieléctrico de longitud $2L$ y diámetro $2R$. B y G son tapa superficie y orilla, respectivamente, donde hay cargas de polarización acumuladas.

El momento del dipolo del cilindro en una segunda aproximación se produce cuando [6]:

$$\vec{P} = \epsilon_0 (\epsilon_p^* - \epsilon_m^*) \vec{E}_0 \cdot \alpha = \epsilon_0 \cdot K(\omega) \cdot \vec{E}_0;$$

siendo

$$\alpha = \left\{ \epsilon_m^* + (\epsilon_p^* - \epsilon_m^*) \left[1 - (1 + R^2 / L^2)^{-1/2} \right] \right\}^{-1} * \left(\begin{array}{l} 1 + \frac{\frac{1}{2} - \left(1 + \frac{R^2}{L^2}\right)^{-\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{8L^2}{R^2}\right)^{-1}}{(\epsilon_p^* - \epsilon_m^*)^{-1} + 1 - \frac{7}{16} \left(1 + \frac{11R^2}{56L^2}\right)} \\ + \frac{\frac{1}{2L} (R^2 + 2L^2) \left(R^2 + 4L^2 \right)^{-\frac{1}{2}} - \frac{1}{2L} R}{(\epsilon_p^* - \epsilon_m^*)^{-1} + 1 - \frac{7}{16} \left(1 + \frac{11R^2}{56L^2}\right)} \end{array} \right) \quad (9)$$

A $K(\omega)$ se le conoce como factor de Clausius Mossotti. Aquí hemos incluido una condición experimental de manipulación de fuerza electrocinética, donde el cuerpo de forma cilíndrica de longitud L y radio R posee una constante dieléctrica compleja ϵ_p^* y es envuelto en un medio de suspensión líquido dieléctrico complejo de constante ϵ_m^* .

IV El factor CLAUSIUS-MOSSOTTI

El factor de Clausius-Mossotti $K(\omega)$ es una medida de la polarizabilidad efectiva de la partícula, y depende del factor de depolarización α , este a su vez tiene dependencia primordialmente de la forma geométrica del objeto dieléctrico. Con la permitividad ϵ , y la conductividad eléctrica de algún medio dieléctrico, σ , la permitividad compleja se define como

$$\epsilon^* = \epsilon - j(\sigma / \epsilon_0 \omega), \quad (10)$$

siendo j la unidad imaginaria $(-1)^{1/2}$.

En lugar de la ecuación (9) para el factor de depolarización general de un cilindro, y debido al hecho, que las partículas aquí mencionadas cumplen con la condición que su largo L es varias veces mayor que su diámetro, aplicamos a el cálculo la siguiente relación $f(q)$ según la ecuación (6). Llegamos entonces a la siguiente ecuación para el factor de Clausius Mossotti:

$$K(\omega) = \frac{\epsilon_p^* - \epsilon_m^*}{\epsilon_m^* + (\epsilon_p^* - \epsilon_m^*) \cdot f(q)}. \quad (11)$$

Consecuentemente, el factor de Clausius-Mossotti depende de la frecuencia del campo aplicado, además de las propiedades dieléctricas y geométricas de la partícula y el medio, según la ecuación (10).

Cuando solo las dependencias de la frecuencia son objeto de estudio, es suficiente considerar $K(\omega)$ como la parte dependiente de la frecuencia del momento del dipolo inducido [2]. $K(\omega)$ por ser un factor complejo, se compone por una parte real y por una imaginaria, la parte imaginaria de este factor es proporcional a la fuerza de electrorrotación o torque de la partícula de geometría cilíndrica.

V Electrorrotación de un cilindro corto

Un campo eléctrico circularmente polarizado rotando induce un momento dipolar circundante.

El torque rotacional promediado en estas condiciones, aplicado a una partícula es dado por el vector producto del momento del dipolo inducido y el campo conjugado [5].

$$\langle \vec{\Gamma}(\omega) \rangle = \frac{1}{2} \cdot V \cdot \text{Im}[\vec{P}x\vec{E}^*]. \quad (12)$$

El momento del dipolo inducido $\vec{p} = V \cdot \vec{P}$ es proporcional al campo externo \vec{E} , la permitividad media de la suspensión ϵ_m^* y el volumen V del objeto.

La fricción de los objetos dieléctricos con el medio líquido debe afectar la movilidad tanto en electrorrotación como en dielectrofóresis. Ignorando las fuerzas flotantes y el movimiento Browniano, la ecuación de movimiento puede ser escrita como

$$\vec{p} \frac{du}{dt} = \vec{F}_{EK} - \vec{F}_{drag}, \quad (13)$$

donde \vec{F}_{EK} es la fuerza de electrorrotación o la fuerza dielectroforética. La velocidad instantánea u es proporcional a la fuerza electrocinética instantánea

$$u = \vec{F}_{EK} / \vec{F}_f, \quad (14)$$

y sustituyendo \vec{F}_{EK} se obtiene

$$\vec{u} = \frac{V \cdot \epsilon_0 \epsilon_m^* \text{Im}[K(\omega)] \vec{E}_0^2}{2\vec{F}_f}, \quad (15)$$

siendo

$$\vec{F}_f = K\eta\vec{u}, \quad (16)$$

la fuerza de fricción, donde K es el coeficiente de fricción, y η es la viscosidad del medio líquido.

El torque depende de la parte imaginaria del factor de Clausius-Mossotti, mientras la fuerza electroforética va con la parte real. La importancia de esta diferencia basada en el factor, es que una partícula puede experimentar la fuerza dielectroforética y el torque simultáneamente.

VI Espectros de electrorrotación para diferentes longitudes de TMV

Ahora tenemos la información necesaria para obtener los espectros de electrorrotación para una biopartícula específica, en este caso hablamos del Virus Mosaico del Tabaco (TMV). Los parámetros para el TMV descritos, se presentan en la tabla 1.

L	$2R$	ϵ_p	ϵ_m	σ_p	σ_m
25nm	18nm	55	78.5	0.085	σ_{m1} a σ_{m5}

Tabla 1. Valores de los parámetros de la biopartícula y del medio de solución acuosa (σ_m).

Además vamos a colocar las biopartículas en soluciones acuosas con diferentes valores σ_m , los cuales se muestran en la tabla 2. Esto con el fin de estudiar el efecto de la conductividad del medio sobre la electrorrotación.

Podemos graficar $Im\{K(\omega)\}$ contra la frecuencia angular ω . De esta manera obtenemos los espectros de electrorrotación para diferentes longitudes L del TMV.

σ_{m1}	σ_{m2}	σ_{m3}	σ_{m4}	σ_{m5}
0.001	0.005	0.01	0.05	0.1
S/m	S/m	S/m	S/m	S/m

Tabla 2. Distintos valores de la conductividad de la solución acuosa empleada como medio en el cual están inmersas las biomoléculas del TMV.

En la figuras 2 y 3 se muestran los espectros de electrorrotación para el TMV, con los valores para la conductividad del medio tomados de la tabla 2. De la figura 2, se puede apreciar como el máximo torque se obtiene a frecuencias un poco mayores de 10^6 rad/s, entre más pequeña es la longitud del cilindro, el torque es menor, y se obtiene el máximo a frecuencias mayores. Además en la figura 3 se observa como se obtiene un torque mayor a bajas conductividades de la solución acuosa.

La velocidad de la biopartícula se puede obtener desarrollando la ecuación (15), obteniéndose:

$$\bar{u} = \left[\frac{V \epsilon_0 \epsilon_m \text{Im}\{K(\omega)\} \bar{E}_0^2}{12\pi R \eta} \right]^{1/2} \quad (17)$$

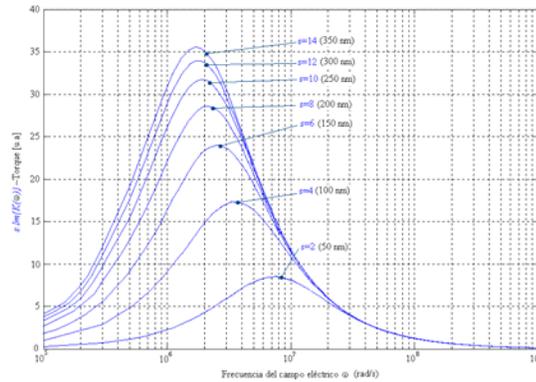


Figura 2. (a) Espectro de electrorrotación para diferentes longitudes del TMV. El torque es proporcional a $\text{Im}\{K(\omega)\}$. Se muestra $s \cdot \text{Im}\{K(\omega)\}$ vs la frecuencia ω del campo eléctrico en rotación. La conductividad de la solución acuosa empleada como medio es $\sigma_{m1} = 0.001$ S/m.

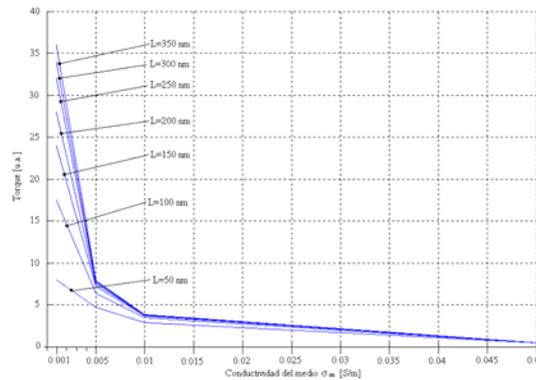


Figura 3. El torque ($\sim \text{Im}\{K(\omega)\}$) vs la conductividad del medio σ_m , para un TMV de longitud $L=50$ nm ($s=2$), $L=100$ nm ($s=4$), $L=150$ nm ($s=6$), $L=200$ nm ($s=8$), $L=250$ nm ($s=10$), $L=300$ nm ($s=12$), $L=350$ nm ($s=14$).

Además la frecuencia de rotación a través del eje perpendicular al eje de una partícula cilíndrica, de longitud L está dada por:

$$W = \frac{\bar{u}}{L/2} \quad (18)$$

La manera práctica para poder controlar la velocidad tangencial u de la biopartícula, es variando la intensidad del campo eléctrico \vec{E}_0 , como $\vec{E}_0 = U/d$ [V/m], donde U es el voltaje y d la distancia que separa los electrodos, que consideramos fija con un valor de 10 μm . Entonces basta con variar el voltaje U , que en este caso variamos desde cero a 20 V y obtenemos una variación del campo eléctrico \vec{E}_0 de 0 a $2 \cdot 10^6$ V/m.

La gráfica de frecuencia de rotación W contra la conductividad se muestra en la figura 4. De la misma manera se obtiene la gráfica para la frecuencia de rotación W contra la intensidad del campo eléctrico \vec{E}_0 que se muestra en la figura 5.

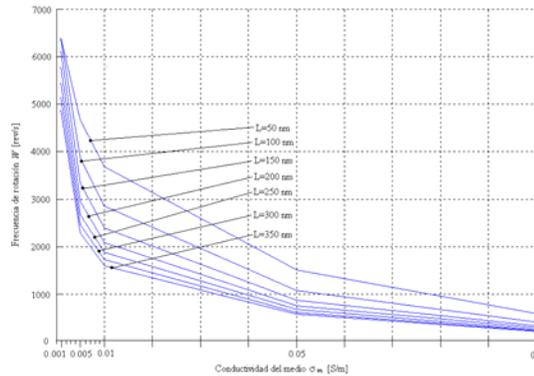


Figura 4. Frecuencia de rotación W contra la conductividad del medio σ_m para diferentes longitudes L del TMV.

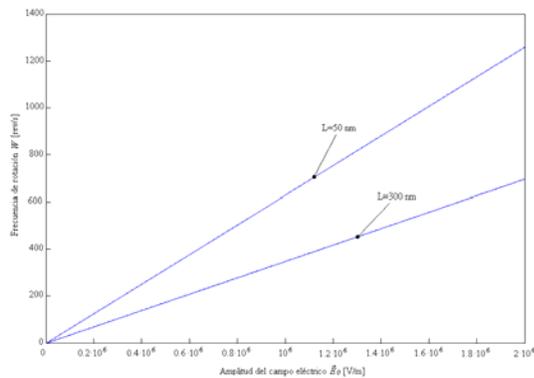


Figura 5. Frecuencia de rotación W contra la intensidad del campo eléctrico \vec{E}_0 , para longitudes de $L=50$ nm y $L=300$ nm, con una conductividad del medio $\sigma_m = 0.001$ S/m.

De las dos últimas gráficas podemos observar de manera satisfactoria, que si es posible rotar de manera controlada cilindros de dimensiones nanométricas y además a velocidades increíbles, por ejemplo, un cilindro de 50 nm de longitud suspendido en una solución acuosa de conductividad $\sigma_m = 0.001$ S/m puede girar a alrededor de 6000 rev/s.

VII Conclusiones

El objetivo principal del presente trabajo ha consistido en el estudio de un movimiento rotativo de una biopartícula, - en este caso del Virus Mosaico del Tabaco -, suspendida en una solución acuosa y aplicando un campo eléctrico externo variable en tiempo.

La fuerza que actúa sobre el TMV y que lo hace mover, depende entre otros parámetros sensiblemente de este factor $f(q)$.

Esta propiedad fue aprovechada en el presente trabajo para generar un patrón de espectros que demuestran la dependencia del torque sobre una macromolécula de una cierta longitud, de la frecuencia de un campo eléctrico externo. Además resulta de suma importancia encontrar que también se puede controlar la velocidad tangencial y por consiguiente la frecuencia de rotación de la biopartícula variando la intensidad del campo eléctrico.

Concluimos por lo tanto que la técnica de electrorrotación, aplicada a nanosistemas moleculares, es útil en la generación y el control de un movimiento rotativo de una ‘nano-hélice’, formada en el presente trabajo por los cilindros de diferentes longitudes de TMV. Los resultados aquí obtenidos pueden formar la base para futuros desarrollos en el control de movimientos de nanosistemas, e incluso de aplicaciones originales

VIII Agradecimientos

El autor le agradece al CONACyT el apoyo otorgado a través de la Beca para Estudios de Maestría # 177160.

IX Referencias

- [1]. Zehe A. *MOLETRONICA: La Electrónica y Fotónica a Escala Nanométrica entre Semiconductores y Arreglos Moleculares*. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. www.moletronica.buap.mx. (Puebla México, 2003).
- [2]. Zehe A. *Nanociencia y Naoelectrónica a Escala Molecular: La Ley de MOORE más allá de la Microelectrónica convencional*. Internet Electrón. J. Nanocs. Moletrón. vol.1, N°1 Págs. 1-9 www.revista-nanociencia.ece.buap.mx (2003).
- [3]. Ramos A., Morgan H., Green N. G., and Castellanos A., *AC electrokinetics: a review of forces in microelectrode structures*, J. Phys. D: Appl. Phys. 31 2338-53, (1998).
- [4]. Zimmermann U., and Neil G.A., *Electromanipulation of Cells*, (Boca Raton, F.L.: Chemical Rubber Company, 1996).
- [5]. Jones T.B., *Electromechanics of Particles*, (Cambridge: Cambridge University Press, 1995).
- [6]. Zehe, A., Ramírez, A. “*The depolarization local field in polarizables objects of arbitrary shape*”, RMF Revista Mexicana de Física, Vo. 48, N° 5, pp. 427-431(2002).